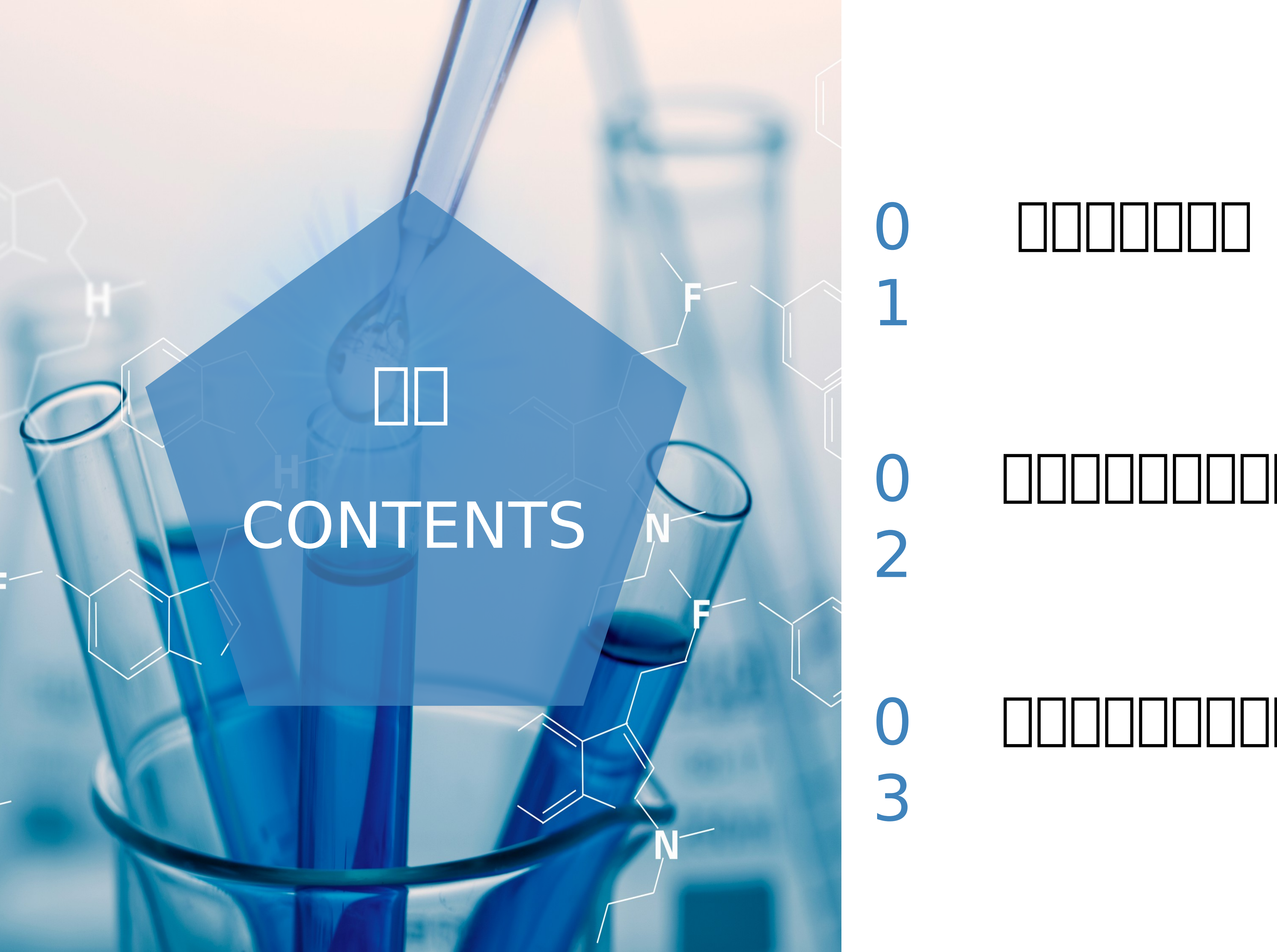
上好课

人教版 2019 高二

第二章 分子结构与性质

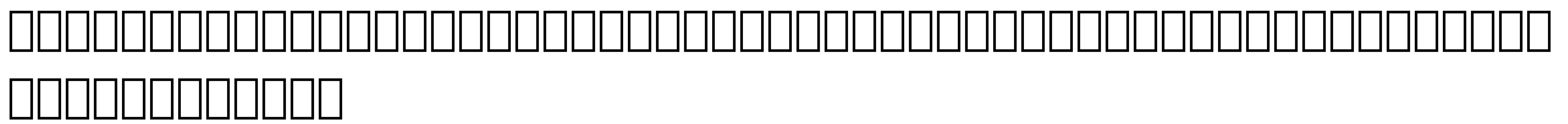
第二节 分子的空间结构

第 1 课时：分子结构的测定、多样的分子空间结构、价层□子对互斥模□

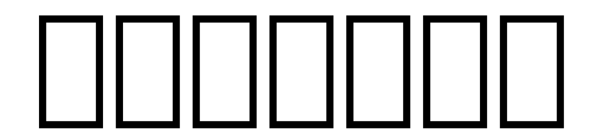

CONTENTS

新课导入

通过刚才的视频，我们看到分子的空间结构多种多样，分子是我们肉眼看不到的，他们的结构是如何确定的呢，通过今天的探究我们就能解决这个问题。



PART 01



一、分子结构的确定

1 、传统方法

2 、现代仪器

(1) 晶体 X 射线衍射

(2) 红外光谱

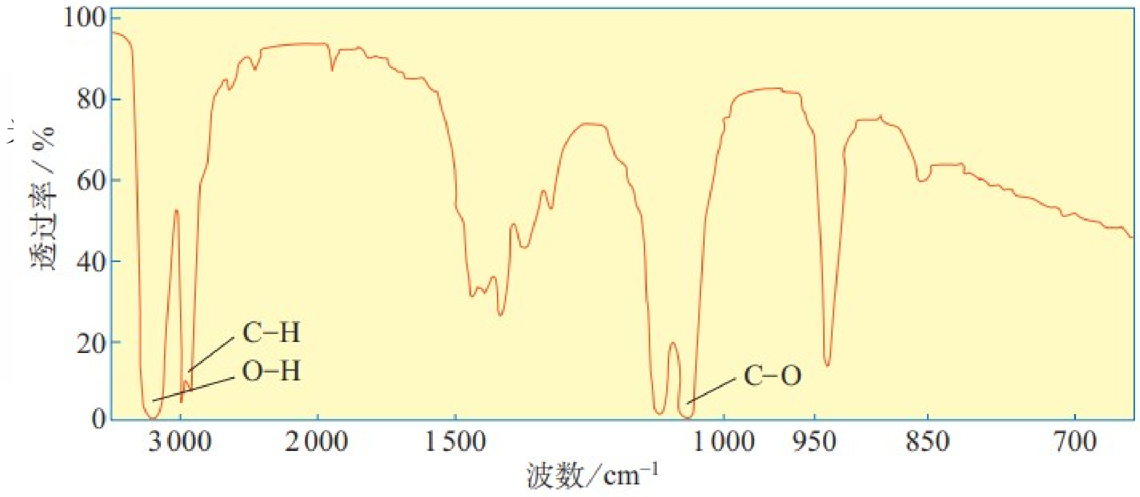


图 2-6 某未知物的红外光谱

红外光谱仪→化学键和官能团

]定原理

|动的，而是不断地振动着的。当

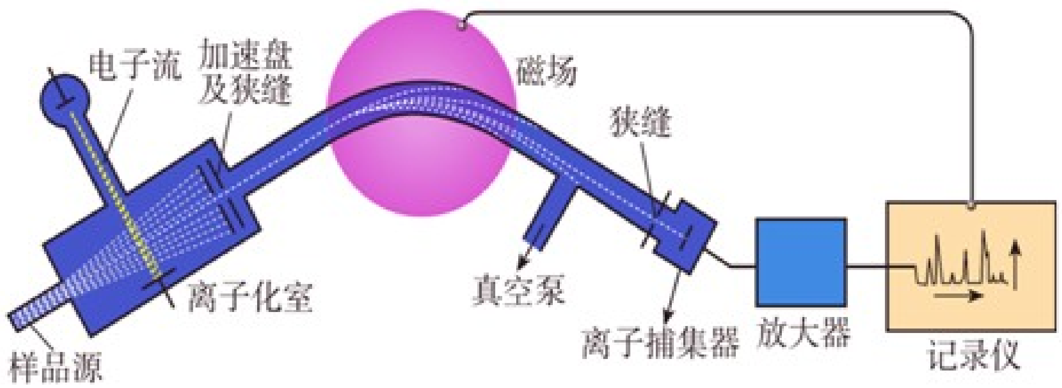
|分子会吸收跟它的某些化学键的

|再记录到图谱上呈现吸收峰。通

|通过量子化学计算，可以得知各

吸收峰是由哪种化学键、哪种振动方式引起的。

原子半径的确定



（3）质谱仪法

质谱仪→分子的相对分子质量

（读图横坐标最大值）

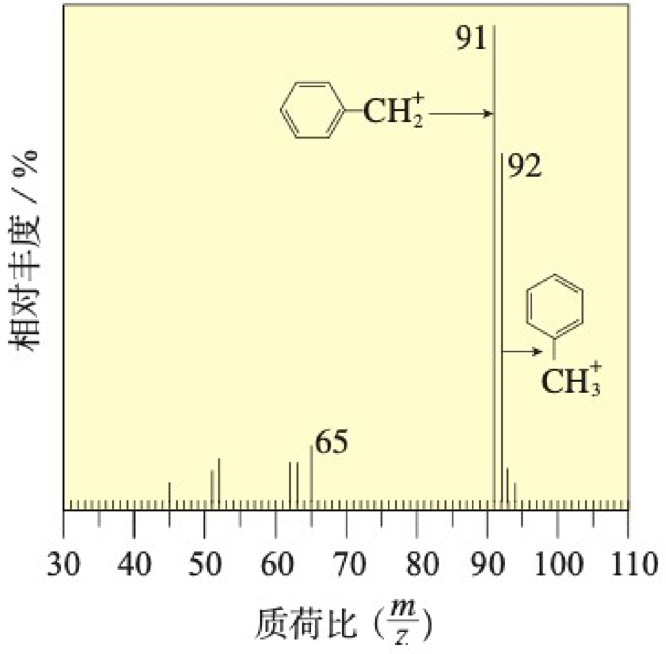


图2-9　甲苯分子的质谱图

质谱法的测定原理

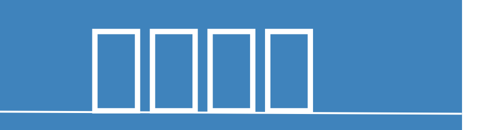
在质谱仪中使分子失去电子变成带正电荷的分子离子和碎片离子等粒子。由于生成的离子具有不同的相对质量，它们在高压电场加速后，通过狭缝进入磁场得以分离，在记录仪上呈现一系列峰，化学家对这些峰进行系统分析，便可得知样品分子的相对分子质量。

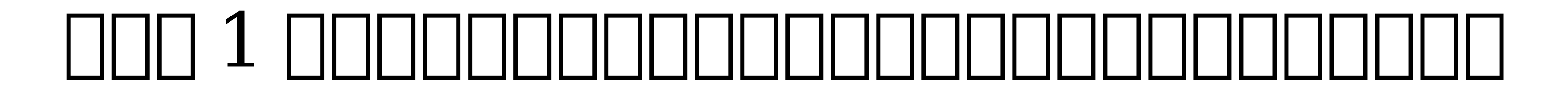
纵坐标是相对丰度（与粒子的浓度成正比）

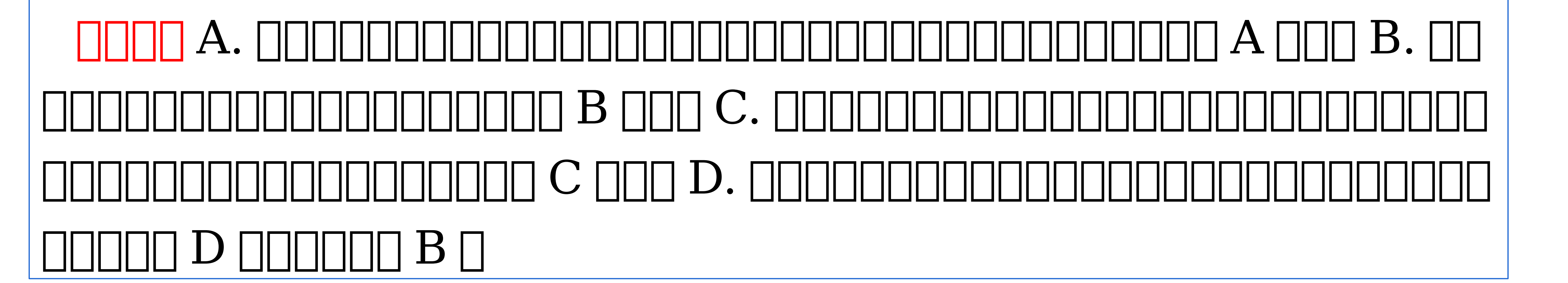
横坐标是粒子的相对质量与其电荷数之比，简称质荷比

对应训练
【典例 1】在研究有机物的组成和结构时，可用于确定化学键和官能团
信息的方法是（ ）
A. 质谱法 B. 红外光谱法 C. 核磁共振氢谱法 D. 燃烧法

【解析】A. 质谱法用于测定有机物的相对分子质量，不能测定出有机物的化学键和官能团，A错误；B. 红外光谱法能测定出有机物的官能团和化学键，B正确；C. 核磁共振氢谱法用于测定有机物分子中氢原子的种类和数目，不能测定出有机物的化学键和官能团，C错误；D. 燃烧法用于元素的定性分析和定量测定，不能确定化学键和官能团信息，D错误。答案：B。

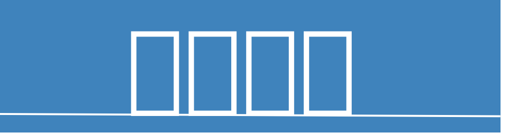


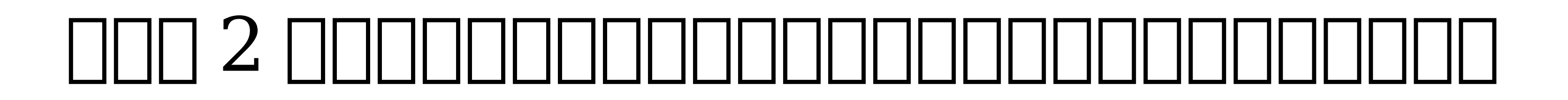




对应训练

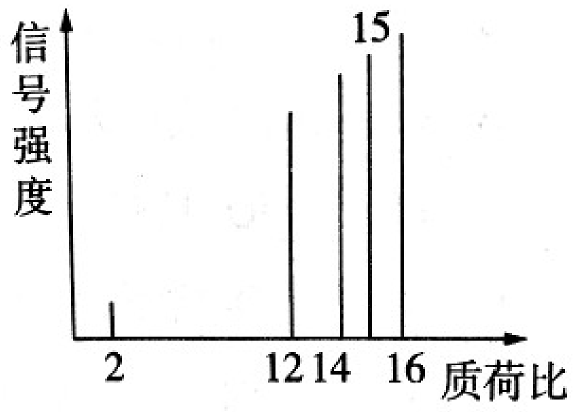
【典例2】能够快速、微量、精确测定有机物相对分子质量的物理方法
是（ ）
A. 红外光谱法 B. 质谱法 C. 核磁共振氢谱法 D. 色谱法
【解析】红外光谱法主要用于鉴定官能团；质谱法其实是把有机物打成很多带正电荷的粒子，在记录仪上会有很多不同的峰出现，从而推测出该有机物的相对分子质量, 所以能够快速、微量、精确测定有机物相对分子质量的物理方法是质谱法；核磁共振氢谱法用于判断等效氢种类；色谱法是分离混合物的一种方法。综上所述，B项符合题意。答案：B





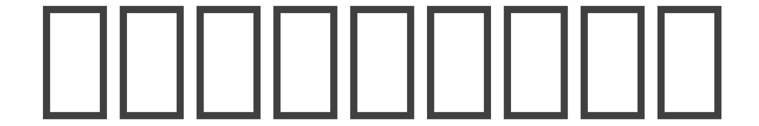
对应训练

【典例 3 】质谱法能够对有机分子结构进行分析，其方法是让极少量的 (10^{-9}g) 化合物通过质谱仪的离子化室，样品分子大量离子化，少量分子碎裂成更小的离子，然后测定其质荷比。其有机物样品的质荷比如图所示（假设离子均带一个单位正电荷，信号强度与该离子的多少有关），该有机物可能是（ ）



【解析】从题图看出质荷比的最大值是 16，所以该物质的相对分子质量是 16，所以可能是甲烷。答案： B 。

PART 02



二、多样的分子空间结构

任务二：探究多样的分子空间结构

学生活动：阅读教材 $\mathbf{P_{43}}$ 第 **1**，**2**，**3** 自然段和 $\mathbf{P_{44}}$ 资料卡片，回答下列问题：

1、三原子分子的空间结构——_______形和_______形（又称______形）

化学式	电子式	结构式	键角	空间结构名称
CO_2				
H_2O				

2、大多数四原子分子常见的空间结构——____________形和____________形

化学式	电子式	结构式	键角	空间结构名称
CH_2O				
NH_3				

二、多样的分子空间结构

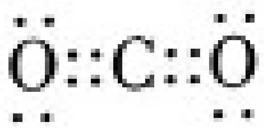
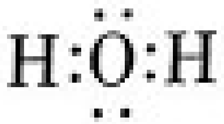
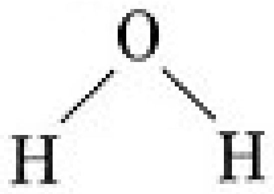
3、五原子分子常见的空间结构——________形：

化学式	电子式	结构式	键角	空间结构名称
CH_4				

4、$\mathbf{C_2H_6}$ 的椅式和船式的稳定性强弱?

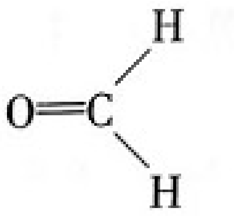
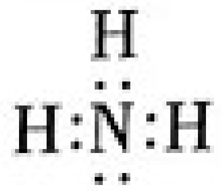
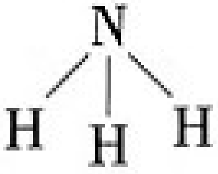
多样的分子空间结构

1、三原子分子的空间结构——______形和 直线 ______形（又称 V ______形） 角

化学式	电子式	结构式	键角	空间结构名称
CO_2		O=C=O	180º	直线形
H_2O			105º	V 形

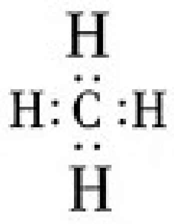
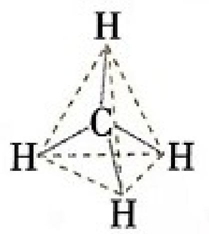
四原子分子的空间结构大多数为平面三角形和三角锥形，也有的为直线形（如 C_2H_2）、正四面体形（如 P_4）等

2、大多数四原子分子常见的空间结构——________平面三角形和________三角锥形

化学式	电子式	结构式	键角	空间结构名称
CH_2O			约 120º	平面三角形
NH_3			107º	三角锥形

多样的分子空间结构

3 、五原子分子常见的空间结构——_______________形四面体

化学式	电子式	结构式	键角	空间结构名称
CH_4			109º28´	正四面体形

4 、C_2H_6 的椅式和船式的稳定性强弱?

C_2H_6 的椅式比船式稳定

对应训练

【典例 1 】下列分子的空间结构模型正确的是（）

A. CO_2 的空间结构模型

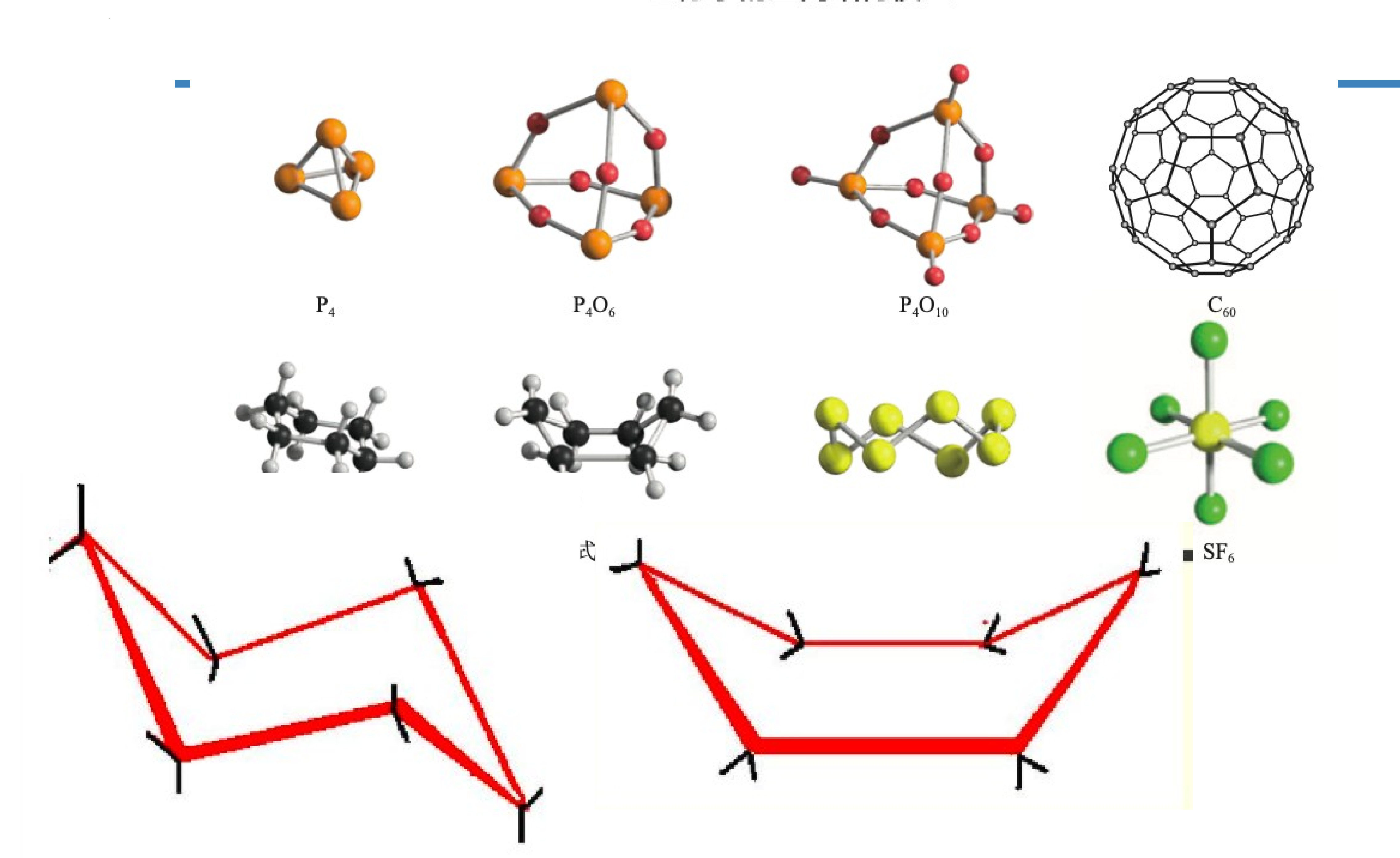
B. H_2O 的空间结构模型

C. NH_3 的空间结构模型

D. CH_4 的空间结构模型

【解析】 CO_2 的空间结构模型为直线形， A 项错误； H_2O 的空间结构模型为 V 形， B 项错误； NH_3 的空间结构模型为三角锥形， C 项错误； CH_4 的空间结构模型为正四面体形， D 项正确。答案： D 。

一些分子的空间结构模型



对应训练

【典例2】下列分子的空间结构与分子中共价键键角对应正确
的是（ ）
A.V形：105° B. 平面正三角形：120°
C. 三角锥形：109°28´ D. 正四面体形：109°28´

【解析】A. 二氧化硫分子为V形，键角不是 105°, 故A错误；C. 氨气分子为三角锥形，键角为 107°, 故C错误；D. 白磷分子为正四面体形，键角为60°, 故D错误。答案：B。

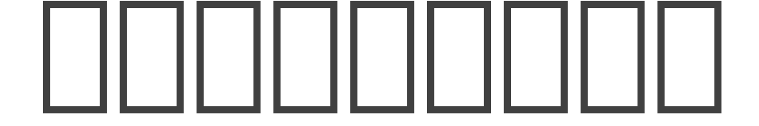
对应训练

【典例 3】下列物质分子的空间结构与 CH_4 相同的是（）

A. H_2O　B. P_4　C. NH_3　D. CO_2

【解析】 CH_4 是正四面体形结构，H_2O 是 V 形结构，NH_3 是三角锥形结构，P_4 是正四面体形结构，CO_2 是直线形结构。答案：B 。

PART 03



三、价层电子对互斥理论（VSEPR）

【任务】探究价层电子对互斥模型的相关内容

学生活动：阅读教材 P_{44} 和 P_{45} 及表格 2-3，小组合作，回答下列问题：

1、价层电子对互斥模型的应用？

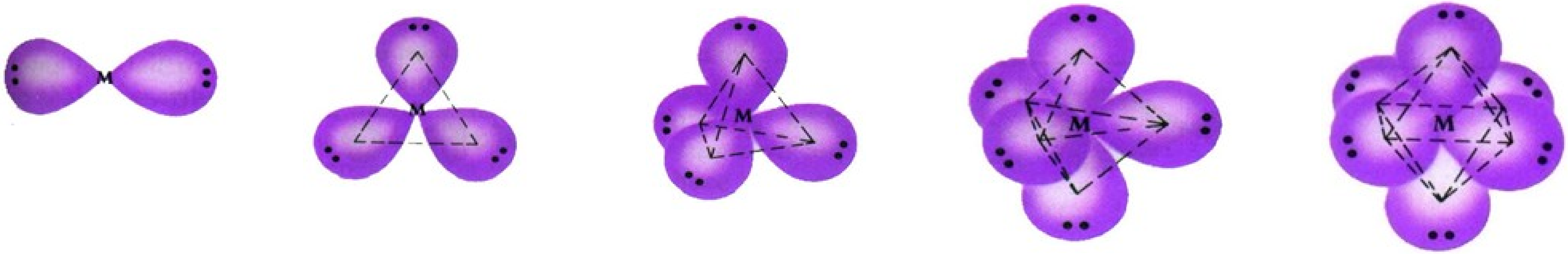
2、价层电子对互斥模型的内容？

三、价层电子对互斥理论（VSEPR）

1、VSEPR 理论　　AB_x

分子空间结构是中心原子周围的价层电子对相互排斥的结果

解释：电子对之间因为存在排斥力，所以电子对在空间应尽量远离，
这样排斥力最小，能量最低，结构最稳定



三、价层电子对互斥理论（VSEPR）

2、构建 VSEPR 模型

AB_x

Ⅰ、确定价层电子对数

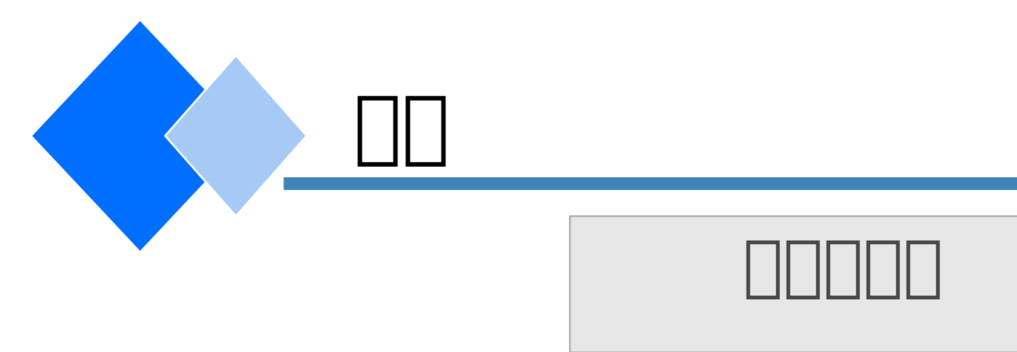
价层电子对 ＝ 中心原子的 σ 键电子对 ＋ 中心原子上的孤电子对

(1)σ 键电子对: σ 键电子对数 = 结合原子数

σ 键电子对可由化学式确定

注意：多重键只计其中的 σ 键电子对，不计 π 键电子对

例如：CH_4、SO_2、NH_3、H_2O、CO_3^{2-}、NH_4^+



[illegible]

[illegible]	σ [illegible]
H_2O	
NH_3	
CO_2	
BF_3	
CH_4	
CO_3^{2-}	
NH_4^+	

三、价层电子对互斥理论（VSEPR）

2、构建 VSEPR 模型

AB_x

Ⅰ、确定价层电子对数

(2) 孤电子对数的确定

公式计算

孤电子对数＝ $(\frac{1}{2} xb)$

三、价层电子对互斥理论（VSEPR）

孤电子对数＝ $\left(\frac{1}{2}\ xb\right)$

a：中心原子的价电子数（对于主族元素等于原子的最外层电子数）

对于阳离子，**a＝** 价电子数 **-** 离子电荷数；

对于阴离子，**a＝** 价电子数 **+|** 离子电荷数 **|** 。

x：与中心原子结合的原子数

b：与中心原子结合的原子最多能接受的电子数

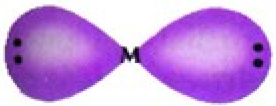
（氢为 **1** ，其他原子为“ **8** 减去该原子的价电子数”）

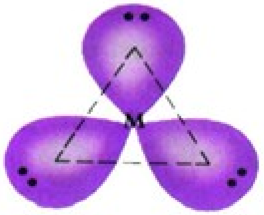
三、价层电子对互斥理论（VSEPR）

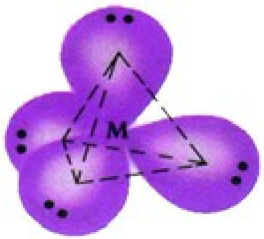
价层电子对 ＝ 中心原子的 σ 键电子对 ＋ 中心原子上的孤电子对

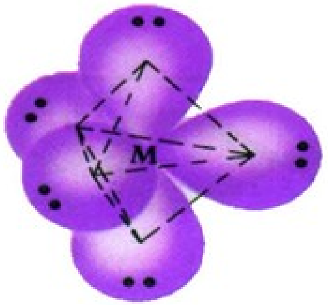
II. 确定分子的 VSEPR 模型

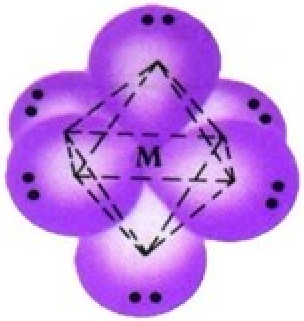
价层电子对数目	2	3	4	5	6
价层电子对构型	直线形	平面三角形	四面体	* 三角双锥体	* 正八面体







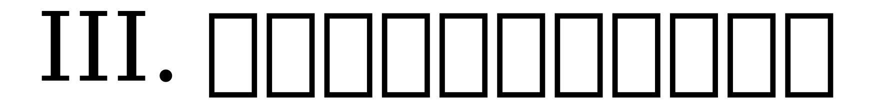


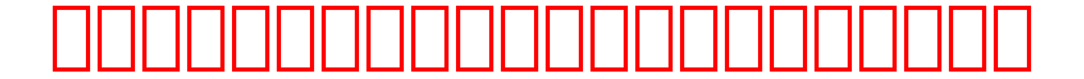


三、价层电子对互斥理论（VSEPR）

III. 确定微粒最终的空间结构
略去孤电子对，确定粒子的空间结构

注意：不能用于预测以过渡金属为中心原子的分子





[illegible]	σ [illegible]	[illegible]	[illegible]	VSEPR [illegible]	[illegible]
H_2O					
NH_3					
CO_2					
BF_3					
CH_4					
CO_3^{2-}					
NH_4^+					

解释键角（孤电子对键角的影响）

分子或离子	VSEPR 模型	分子构型	键角
H_2O			
NH_3			
CH_4			

排斥作用的一般规律：

孤电子对与孤电子对＞孤电子对与成键电子对＞成键电子对与成键电子对

□□NO_2^{-}□□□120°

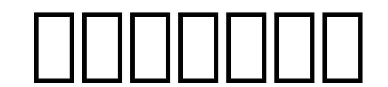
价层电子对互斥模型

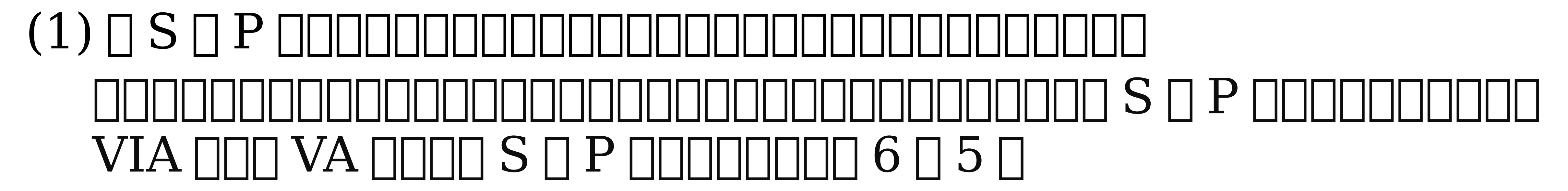
【思考与讨论】

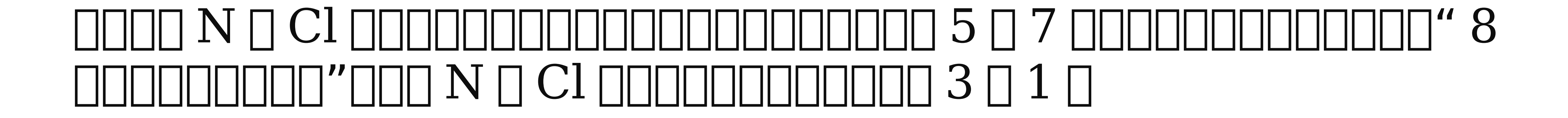
(1)以 S和P为例，说明如何根据主族元素在周期表中的位置确定它的价电子数。依据元素周期表可判断主族元素的族序数等于最外层电子数，也等于价电子数。S和P都分别处于第三周期第 VIA族和第VA族，因此 S和P的价电子数分别为6和 5。

(2)以N和C1 为例，说明如何根据主族元素在周期表中的位置确定它最多能接受的电子数。

首先依据N和Cl在元素周期表中的位置，判断其价电子数分别为 5和 7，它们最多能接受的电子数为“ 8 减去原子的价电子数”，因此N和Cl最多能接受的电子数分别为3和 1。







对应训练

【典例 1 】下列分子或离子中含有孤电子对的是（）

A.H_2O　B. CH_4　C. SiH_4　D.NH_4^+

【解析】 H_2O 有 2 对孤电子对，其余均无孤电子对。答案： A 。

对应训练

【典例 2】SO_3^{2-} 的中心原子孤电子对计算公式为 1/2(a-xb) 中，下列对应的数值正确的是（）

A.a=8 x=3 b=2　　B.a=6 x=3 b=2

C.a=4 x=2 b=3　　D.a=6 x=2 b=3

【解析】SO_3^{2-} 的中心原子孤电子对计算公式 1/2(a-xb) 中，a 指中心原子价电子个数，x 指配原子个数，b 指配原子形成稳定结构需要的电子个数，因此 a=6+2=8,x=3,b=2。答案：A。

对应训练

【典例 3】下列有关价层电子对互斥模型的描述正确的是（）

A. 价层电子对就是 σ 键电子对

B. 孤电子对数由分子式来确定

C. 分子的空间结构是价层电子对互斥的结果

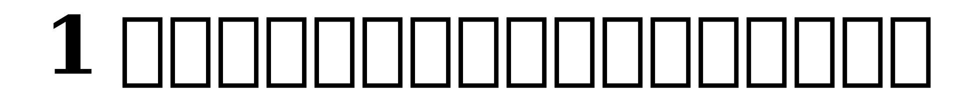
D. 孤电子对数等于 π 键数

【解析】价层电子对数是 σ 键电子对数与孤电子对数之和，孤电子对数是指没有成键的价电子对数，其与中心原子价层电子总数、与中心原子结合的原子最多能接受的电子数及与中心原子结合的原子数有关， A 、B 、D 项错误。答案：B

三、价层电子对互斥理论（VSEPR）

1、中心原子的价层电子对数如何确定？
σ 键电子对数 + 孤电子对数 = 价层电子对数
2、VSEPR模型与分子的空间构型有什么关系？
略去VSEPR模型中的中心原子上的孤电子对，便可得到分子的空间结构

3、价层电子对互斥模型不能用于预测什么样的分子？
价层电子对互斥模型对分子空间结构的预测少有失误，但它不能用于预测以过渡金属为中心原子的分子



总结

应用 **VSEPR** 模型预测粒子空间结构的步骤

I.

（**1**）计算中心原子的成键电子对数＝结合原子数

（**2**）计算中心原子上的孤电子对数 **$= 1/2(a-xb)$**

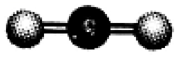
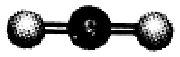
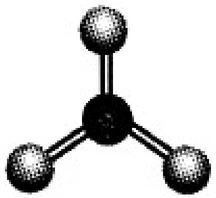
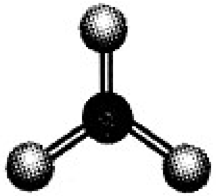
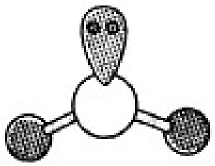
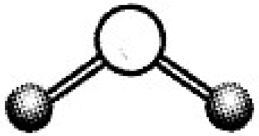
（**3**）价层电子对数＝ **σ** 键电子对数＋孤电子对数

II. 确定 **VSEPR** 理想模型

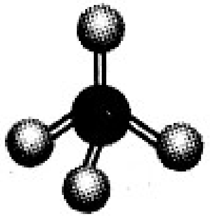
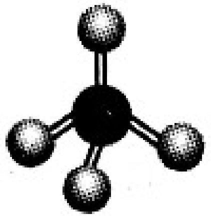
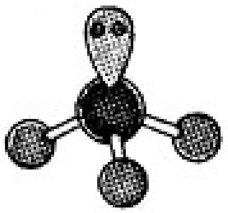
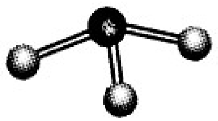
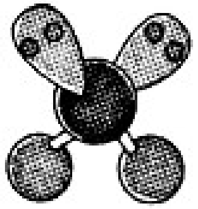
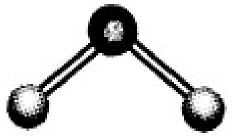
III. 略去孤电子对，确定粒子的空间结构

三、价层电子对互斥理论（VSEPR）

常见分子或离子的空间结构的推测

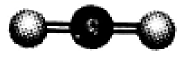
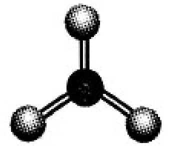
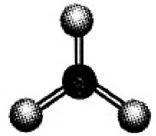
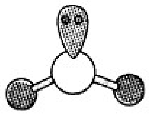
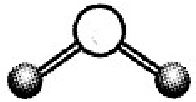
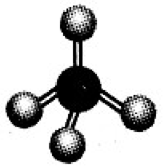
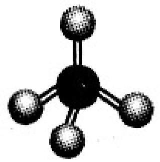
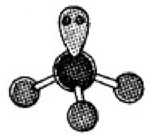
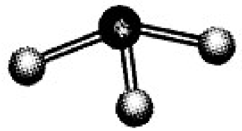
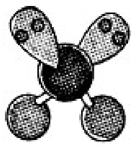
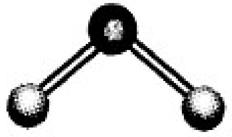
分子或离子	中心原子上的孤电子对数	中心原子上的价层电子对数	VSEPR 模型	VSEPR 模型名称	空间结构	空间结构名称
CO_2、$BeCl_2$	0	2		直线形		直线形
CO_3^{2-}、BF_3	0	3		平面三角形		平面三角形
SO_2、$PbCl_2$	1					V 形

三、价层电子对互斥理论（VSEPR）

分子或离子	中心原子上的孤电子对数	中心原子上的价层电子对数	VSEPR 模型	VSEPR 模型名称	空间结构	空间结构名称
CH_4、CCl_4	0			正四面体形		正四面体形
NH_3、NF_3	1	4		四面体形		三角锥形
H_2O、H_2S	2					V 形

三、价层电子对互斥理论（VSEPR）

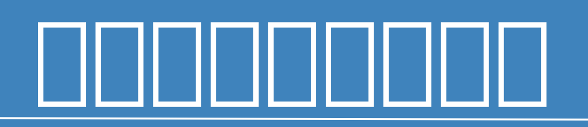
常见分子或离子的空间结构的推测

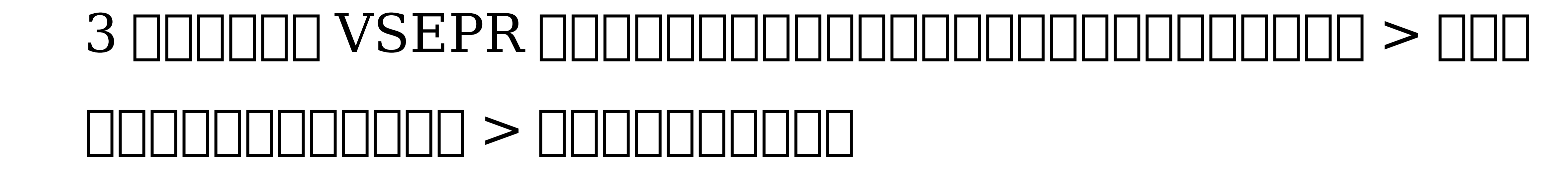
分子或离子	中心原子上的孤电子对数	中心原子上的价层电子对数	VSEPR 模型	VSEPR 模型名称	空间结构	空间结构名称
CO_2、$BeCl_2$	0	2		直线形		直线形
CO_3^{2-}、BF_3	0	3		平面三角形		平面三角形
SO_2、$PbCl_2$	1					V 形
CH_4、CCl_4	0	4		正四面体形		正四面体形
NH_3、NF_3	1			四面体形		三角锥形
H_2O、H_2S	2					V 形

价层电子对互斥模型

说明： 1、中心原子不含孤电子对的分子(或离子)，VSEPR模型与分子(或离子)的空间结构一致
2、中心原子若有孤电子对，孤电子对也要占据中心原子周围的空间，并与成键电子对互相排斥，则 VSEPR模型与分子的空间结构不一致。推测分子的立体模型必须略去 VSEPR模型中的孤
电子对

3、氨气与水的VSEPR模型一致，但空间构型不同的原因是：孤电子对之间的斥力 > 孤电子
对与成键电子对之间的斥力 > 成键电子对之间的斥力





价层电子对互斥模型

【思考与讨论】确定 BF_3 、NH_4^+ 和 SO_3^{2-} 的 VSEPR 模型和它们的空间结构，并与同学讨论

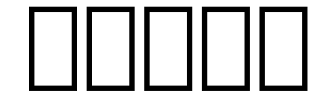
BF_3 的 σ 键电子对数为 3，中心原子 B 的孤电子对数为 0，所以 BF_3 的价层电子对数为 3。BF_3 的 VSEPR 模型为平面三角形， BF_3 的空间结构为平面三角形

NH_4^+ 的 σ 键电子对数为 4，中心原子 N 的孤电子对数为 0, 所以 NH_4^+ 的价层电子对数为 4。NH_4^+ 的 VSEPR 模型为正四面体形， NH_4^+ 的空间结构为正四面体形

SO_3^{2-} 的 σ 键电子对数为 3，中心原子 S 的孤电子对数为 1，所以 SO_3^{2-} 的价层电子对数为 4。SO_3^{2-} 的 VSEPR 模型为四面体形， SO_3^{2-} 的空间结构为三角锥形

小 结

重点识记：
1、利用价层电子对互斥模型预测分子的空间结构
2、常见分子或离子的空间结构的推测表格的应用



对应训练

【典例 1 】用价层电子对互斥模型预测 H_2S 和 $COCl_2$ 的空间结构，两个结论都正确的是（）

A. 直线形；三角锥形　　B.V 形；三角锥形

C. 直线形；平面三角形　　D.V 形；平面三角形

【解析】 H_2S 中的中心原子 S 上的孤电子对数是 $1/2\times(6-1\times2)=2$，则说明 H_2S 中的中心原子的价层电子对数为 4，因此空间结构是 V 形；而 $COCl_2$ 中的中心原子 C 上的孤电子对数是 $1/2\times(4-2\times1-1\times2)=0$，因此 $COCl_2$ 中的中心原子的价电子对数是 3，是平面三角形结构。答案： D 。

对应训练

【典例 2 】下列分子的空间结构为正四面体形的是（）

①P_4 ②NH_3 ③CCl_4 ④CH_4 ⑤H_2S ⑥CO_2

A.①③④⑤ B.①③④⑤⑥ C.①③④ D.④⑤

【解析】 P_4 白磷的结构，正四面体形；氨气三角锥形，四氯化碳和甲烷是正四面体形，硫化氢是 V 形，二氧化碳是直线形。答案： C 。

对应训练

【典例 3】用 VSEPR 模型预测下列分子或离子的空间结构，其中不正确的是（ ）

A. NH_4^+ 为正四面体形　　B. CS_2 为直线形

C. HCN 为 V 形　　D. PCl_3 为三角锥形

【解析】NH_4^+、CS_2、HCN 中心原子上的价电子都用于形成共价键，没有孤电子对，所以其空间结构分别为正四面体形、直线形、直线形；PCl_3 中心 P 原子上有一对孤电子对，未用于形成共价键，其空间结构为三角锥形。

答案：C 。

课堂总结

知识总结

红外光谱的应用：分析出分子中含有何种化学键或官能团的信息

常见分子或离子的空间结构的推测表格的应用

利用价层电子对互斥模型预测分子的空间结构

常见三原子、四原子、五原子分子的电子式、结构式、键角和空间结构

质谱图的使用方法：横坐标最右侧，数值最大的质荷比，就是该分子的相对分子质量

人教版2019 高二

第 1 课时：分子结构的测定、多样的分子空间结构、价层
电子对互斥模型

谢谢观看